



La-CoNGA-Physics

Mecánica Estadística Avanzada

³ Ausencia de Magnetización espontánea en 1-d

Profesora
GLORIA BUENDÍA

Departamento de Física
Universidad Simón Bolívar
Caracas-Venezuela
buendia@usb.ve

Junio-Julio 2023

Contenido General

1 Ausencia de Magnetización espontánea en 1-d	1
2 Modelo de Ising en 2-d	4

1. Ausencia de Magnetización espontánea en 1-d

(Peicrls)

Modelo de *Ising* en $1 - d$ en ausencia de campo externo

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j \quad J > 0$$

Si tenemos una cadena de espines todos paralelos en $1 - d$

$$\begin{array}{l} \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \\ E_p = -NJ \quad S_{N+1} = S_1 \\ \left. \begin{array}{l} \uparrow \\ \downarrow \end{array} \right\} \text{Condiciones de borde periódicas} \\ E_L = -(N-1)J \quad \text{Condiciones de borde libres} \end{array}$$

Esta configuración tiene mínima entropía y mínima energía.

Qué pasa si introducimos un mínimo de desorden, rompiendo un enlace? Creando una barrera

$$\begin{array}{l} \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \downarrow \downarrow \downarrow \downarrow \\ E_p = -(N-2)J + 2J \\ = -NJ + 4J \quad \text{(Condiciones de borde periódicas)} \\ E_L = -(N-2)J + J = -NJ + 3J \quad \text{(Condiciones de borde libres)} \end{array}$$

El costo energético de romper el enlace

$$\begin{array}{l} \Delta E_p = 4J \\ \Delta E_L = 2J \end{array}$$

La entropía del sistema completamente ordenado es 0

$$S_0 = K \ln 1 = 0 \quad \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow$$

Entropía del sistema con un enlace roto

$$S' = K \ln(N-1) \quad \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \downarrow \downarrow \downarrow \downarrow$$

Hay $N - 1$ sitios donde se puede romper el enlace

La variación de energía libre asociada a la creación de una barrera

$$\Delta A = \Delta E - T\Delta S = 4J - KT \ln(N-1)$$

Para sistemas macroscópicos, N es grande

$$\implies \text{Si } T \neq 0^{\circ}K \quad \Delta A < 0$$

Si $T = 0^{\circ}K$ la creación de una barrera siempre minimiza la energía libre. A $T \neq 0^{\circ}K$ la configuración con todos los espines paralelos no es estable, la creación de barreras es favorecida.

La configuración ordenada a $T \neq 0$ no es estable, el desordenar el sistema siempre baja la energía libre.

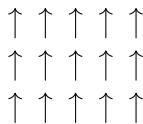
En $1 - d$ el desorden es favorecido frente al orden, $T > 0$

En $1 - d$ los sistemas en equilibrio solo pueden tener transiciones de fase a $T = 0^{\circ}K \implies$ Resultado general para sistemas con interacciones de corto alcance.

Qué pasa si aumentamos la dimensionalidad del sistema?

Se hace más difícil desordenar el sistema.

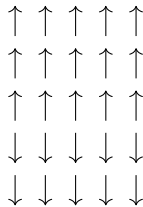
Ejemplo: Ising en $2 - d$ en una red con número de coordinación z



Hay $\frac{N}{2}z$ conexiones

$$E'_0 = -J \frac{Nz}{2} \quad (\text{Red cuadrada } z = 4)$$

Variación energética asociada a la creación de una barrera



Para una red cuadrada $N = L \times L$, hay $\sim 2L$ enlaces rotos (condiciones de borde periódicas), $O \sim L$ enlaces rotos (condiciones de borde libres)

$$E'_L = -J \left[\frac{NZ}{2} - L \right] + JL \quad \begin{array}{l} \uparrow \uparrow \quad e'_0 = -J \\ \downarrow \uparrow \quad e'_f = +J \\ \Delta e = 2J \end{array}$$

$$\Delta E = E_L - E_0 = 2JL = 2J\sqrt{N} \rightarrow \text{Coste energético de crear una barrera en } 2 - d$$

$$\Delta S = K \ln(L - 1) = K \ln(\sqrt{N} - 1) \rightarrow \text{Cambio de entropía al crear una barrera}$$

$$\Delta A = \Delta E - T\Delta S \approx 2J\sqrt{N} - KT \ln(\sqrt{N})$$

Dependiendo de N , ΔA puede ser positivo o negativo

Si $\Delta A > 0$ (T bajas) Se favorece el orden.

Si $\Delta A < 0$ (T altas) Se favorece el desorden.

Esto permite dar un estimado de la T_C

$$\begin{aligned} \Delta A = 0 &\implies 2J\sqrt{N} - KT_C \ln \sqrt{N} = 0 \\ &\implies KT_C = \frac{2J\sqrt{N}}{\frac{1}{2} \ln N} = 4J \frac{\sqrt{N}}{\ln N} \end{aligned}$$

Note que T_C depende de tipo de red (depende de z)

El modelo de *Ising* es uno de los pocos modelos de partículas interactuantes para el que se conoce solución exacta, y es el más simple de ellos.

en 1 y 2 dimensiones

Tiene un papel fundamental en la comprensión del ferromagnetismo y de las transiciones de fase. El modelo de *Ising* y generalizaciones del mismo son útiles para entender una variedad de fenómenos, no solo en la física, sino en otras interdisciplinas (biología, medicina, economía, modelos sociales).

2. Modelo de Ising en 2-d

(Onsager 1949)

$$Z(T, H, N) = \sum_{S_1} \sum_{S_2} \dots \sum_{S_N} e^{\beta [J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j + H \sum_i S_i]}$$

Se utilizan condiciones de borde periódicas.

Fue resuelto por primera vez usando la *Técnica de matriz de Transferencia* por Onsager (1949) y por Yang en presencia de campo externo (1952) y posteriormente con diferentes técnicas de cálculo.

Para una red cuadrada y $H = 0$, en el límite termodinámico la energía libre por partícula

$$\beta f(T) = -\ln(2 \cosh 2\beta J) - \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi d\varphi \ln \left[\frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2 \varphi} \right) \right]$$

$$\kappa = \frac{2 \sinh(2\beta J)}{\cosh^2(2\beta J)}$$

Se encuentra que si $T < T_C$ el sistema tiene magnetización espontánea

$$m(T) = \begin{cases} 0 & T > T_C \\ \left\{ 1 - [\sinh(2\beta J)]^{-4} \right\}^{\frac{1}{8}} & T < T_C \end{cases}$$

Cerca del punto crítico $m(t) \sim A(T_C - T)^{\frac{1}{8}} \implies \beta = \frac{1}{8}$

La capacidad calórica

$$C(T) \sim -2 \frac{K_B}{\pi} \left(\frac{2J}{K_B T_C} \right)^2 \ln \left| 1 - \frac{T}{T_C} \right|$$

↳ Diverge en $T = T_C$

$$K_B T_C = \frac{2J}{\ln(1 + \sqrt{2})} = 2,269 J \quad (\text{Red cuadrada})$$

En dimensiones, $d \geq 3$ no se conoce todavía la solución exacta del modelo, en ningún tipo de red.

Pero existen soluciones aproximadas, y resultantes de simulaciones numéricas que permiten conocer los exponentes críticos con gran precisión. Por ejemplo, el exponente para la magnetización en $3 - d$, es $\beta \approx \frac{1}{3}$, independiente del tipo de red cristalina, y concuerda con el exponente crítico para la transición gas líquido.

→ **Universalidad:** los exponentes críticos no dependen de los sistemas microscópicos.